



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 1, 24.04.2019

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im **Linux Pool, PC-Pool 8, O25/450**, am Donnerstag, dem 02.05.2019, und am Freitag, dem 03.05.2019. Die genaue Uhrzeit wird auf der Webpage der Vorlesung angegeben.

Aufgabe 1: Linux

Wissenschaftliche Rechner benutzen heutzutage vorwiegend Linux als Betriebssystem. Außerdem basieren MAC-Rechner auf einem Unix-Betriebssystem. Daher sollen Sie einige grundlegende Befehle zum Arbeiten auf Linux- bzw. Unix-Rechnern kennenlernen im PC-Pool 8:

<https://www.uni-ulm.de/einrichtungen/kiz/service-katalog/desktop-computing/pc-pools/pc-pool-8/>
Nach der Übung sollten Sie beantworten können, was die folgenden Linux-Befehle bedeuten:

- mkdir Praktikum
- pwd
- mv test.txt test2.txt
- cp test.txt test2.txt
- Mit welchem Linux Befehl löscht man eine Datei?
- Mit welchem Linux-Befehl wechselt man in ein anderes Verzeichnis?

Von einem Windows-Rechner können Sie sich z.B. mit Hilfe des Programms Putty auf Linux-Rechnern einloggen. In der Übung in der nächsten Woche sollen Sie versuchen, zu dem Rechner login.rz.uni-ulm.de eine Verbindung von einem Windows-Rechner aus herzustellen.

Aufgabe 2: Elektrostatische Wechselwirkung

Berechnen Sie den Betrag der Kraft, die zwei Ladungen der Größe 1 C im Abstand von 1 m im freien Raum aufeinander ausüben. Wie groß müsste die Masse eines Teilchens sein, damit es im Gravitationsfeld der Erde die gleiche Kraft erfährt? Welche Schlussfolgerungen lassen sich dadurch für chemische Wechselwirkungen ziehen?

Aufgabe 3: Gradient

Benutzen Sie die Beziehung $\mathbf{F} = -\nabla U$, um das Vektorfeld \mathbf{F} (die Kraft) für folgende Skalarfelder U (Potentiale) zu finden:

- $U = r^2 = x^2 + y^2 + z^2$
- $U = x^2 y^2 z^2$
- $U = \frac{1}{r}$

Falls möglich, benutzen Sie ein Graphikprogramm, um die Skalarfelder und die resultierenden Vektorfelder darzustellen, z.B. Maple, für das die Universität Ulm eine Campuslizenz besitzt und das in der Übung vorgestellt wird. Maple ist ein Computeralgebrasystem, d.h. die besondere Stärke des Programms liegt in symbolischen, mathematischen Berechnungen. Daneben kann man numerische Rechnungen durchführen, eigene Routinen programmieren, sowie 2D- und 3D- Grafiken und Animationen erzeugen.

Hinweis: ∇ ist der Nabla-Operator, für den gilt:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$